

非構造型格子における離散化スキーム

Research of Discretization in Unstructured Grid System

谷口伸行*

Nobuyuki TANIGUCHI

1. はじめに

ナビエ・ストークス式として知られる流れ場の基礎方程式については解析的な一般解を得ることができないことから、従来より数値解析手法が詳しく検討されており、十分な分割数が得られれば、たとえば乱流現象についても基礎方程式の数値解として求めることが原理的に可能であると考えられている。しかし、この方程式の解は境界条件や初期条件の変化に非常に敏感であるため、数値解析においてもstiff(解きにくい)問題であり、計算手法によって解の精度や演算量が著しく異なることがありうる。よって、工学的な目的からは、将来に十分な計算機性能が得られるとしても、最適な計算手法を求めることの重要性は高い。

ところで、2次元、3次元の流れ場数値解析における計算手法や演算量は格子分割の方法によって大きく異なることから、特に計算格子に着目して解析手法を分類することができる。すなわち、格子分割が計算領域全体をカバーする広域的な座標系に基づいて行われる構造型格子と、それ以外の、いわゆる非構造型格子に大別される。数値流体工学の分野で近年大きな成功をおさめつつある、一般座標系による一連の数値解析法は構造型格子による代表的な例であり、この場合、離散化においても広域的

な座標系が用いられる。一方、非構造型格子を適用すると、離散化は局所的な座標系に基づいて定式化される。

格子パターンを階層的に考えると、この分類はさらに図1のように拡張されるが、本報では基本単位となる解析法開発の観点から、非構造型格子(図1b)の適用について考察する。

構造型格子による解析方法は、差分法などに見られるとおり、1次元解析からの拡張で容易に理解できること、現在用いられている計算機のハードウェア構造に適合することなどの利点があり、実際の応用例も非構造型格子に対して多い。一方、格子生成における制約条件が厳しいことは重大な欠点である。流れ場解析法の最適化に関する課題、たとえば、適合格子の自動生成や多重格子による加速解法の適用などを考える際に、格子に対する制約は大きな障害となっている。これらは、非構造型格子の適用をはかる重要な理由である。

上記の観点から評価すると、非構造型格子における解析方法は、最適格子における近似精度だけでなく、不適格な格子に対しても破壊的な結果をもたらさないようなrobust(頑強)な性質をもつことが望ましい。すなわち、最適化の中間過程に生じる変形された格子や、多重格子法における粗格子においても安定な計算が可能であることが求められる。そのためには、少なくとも次の点が考慮される必要がある。

- ① 陰解法の適用および行列計算の効率化
- ② 数値振動を抑制する安定化スキームの導入

非構造型格子におけるこのような解析法の検討は主に有限要素法(FEM)に基づいて行われており、四角形アイソパラメトリック要素による方法¹⁾や三角形要素では上流点を参照する方法²⁾などが提案されている。しかし、これらは格子生成上の制約が少ないという非構造型格子の特長をある程度犠牲にしており、形状に対する適合性を求めるには、

- ③ 三角形1次要素の適用
- が望ましいように思われる。

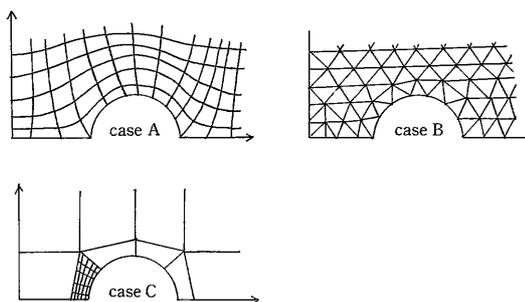


図1 構造型, 非構造型の格子パターン

*東京大学生産技術研究所 第2部

研究速報

本報では、特に 2 次元非圧縮性流れ場の解析を対象に、上記の観点から非構造型格子における離散化スキームについて考察する。

2. 離散化の基本的な手法

流れ場数値解析において、構造型格子での離散手法は差分法 (FDM)、有限要素法 (FEM) および有限体積法 (FVM) に分類されているが、それぞれの手法は非構造型格子に対しても拡張できる。ここでは、筆者らが検討している FVM に基づく方法³⁾を中心に、離散化の基本的な考え方について述べる。

FVM では領域を要素分割する点では FEM と同じであるが、それぞれの要素を検査体積として物理量の保存則に基づいて定式化する。基礎式を検査体積で積分し、対流拡散項を境界積分に変換して、

$$\int_{vol} \frac{\partial \phi}{\partial t} dv + \int_s (\mathbf{v}\phi - \Gamma \nabla \phi) \cdot \mathbf{dn} = \int_{vol} B dv \quad (1)$$

- ϕ : スカラ変数またはベクトル成分
- \mathbf{v} : 流速ベクトル
- Γ : 拡散係数
- B : 生成率

$\int_{vol} dv$: 体積積分

$\int_s \mathbf{dn}$: 境界積分, \mathbf{dn} : 面法線ベクトル

となる。2 次元構造型格子では各格子点を囲むような四角形要素 (この手法ではセルとよぶ) 分割により、差分法と類似の離散化式が誘導できることが示されている。非構造型格子に対しても、以下の条件

- ① 領域は隙間なく、また、重なり合わないセルで分割される。
- ② セル内に格子点を 1 つ含む。
- ③ セルは近似的に凸多角形で、各辺が 1 つの隣接点

との境界となる。
を満たすセル分割が得られれば、同様に定式化されることは容易に理解できる。

非構造型の離散点に基づく領域分割の方法としては、Voronoi diagram が上記の条件を満足する。これをセル分割に適用すると、隣接点との垂直二等分線としてセル境界が定義され、その形状は適当なアルゴリズムで効率よく計算できる。この場合、隣接 2 点と境界面による局所的な直交座標上で構造型格子と同様の定式化により離散化式

$$\frac{d\bar{\phi}}{dt} Vol + \sum_{nb} J_{nb} \cdot S_{nb} = \bar{B} \cdot Vol \quad (2)$$

$$J = U_n \phi - \Gamma (\nabla \phi)_n$$

: 面法線 n 方向の全フラックス

S : 境界面積

Vol : セル体積

ただし、 $\bar{\phi}$, \bar{B} はセル平均値を、 \sum_{nb} は Voronoi diagram で定義する各面についての総和を意味する。が導出できる。以下この方法を Voronoi 法とよぶ。

上記の方法は FEM で質量集中化を適用し、対流拡散項を境界積分に変換して定式化したものとも解釈できる。FEM では積分セルを重心領域 (図 2) と取ることが一般的であるが、Voronoi diagram (三角形要素に対して外心領域と呼ばれる) の適用も提案されている⁴⁾。これらの研究によれば、重心領域に質量集中化を適用した離散化法は計算効率の点で優れているが、高々 2 次の打ち切り誤差精度であることが示されている⁵⁾。Voronoi 法 (外心領域法 FEM) においても対流拡散項の境界積分に関しては重心領域法と同様であり、ここで考えている汎用的で高効率の流れ場解析手法においては、この選択は妥当なものとする。

FVM では境界積分も 1 点で評価しているが、FEM とのアナロジーから評価点は境界面の重心におくことで、

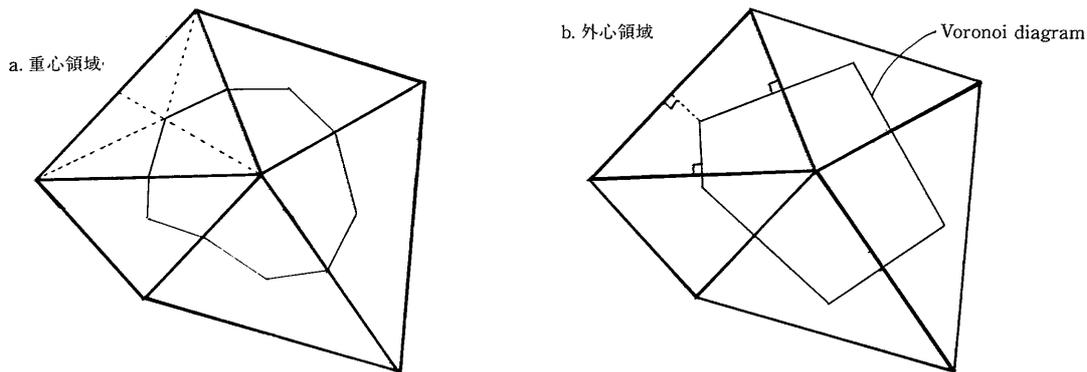


図 2 FEM における質量集中化領域

研究速報

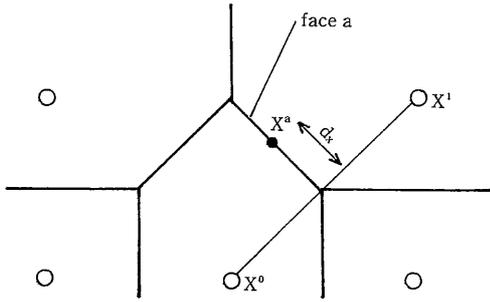


図3 Voronoi法の修正スキーム

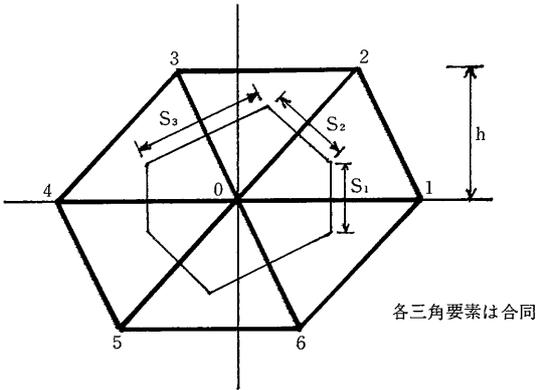


図4 典型的な三角要素による離散化

2次の打ち切り誤差精度が得られることがわかる。よって、Voronoi法での評価点補間値は、たとえば中心差分では

$$\phi_{nb} = \frac{1}{2}(\phi_0 + \phi_1) + dx(\phi'_0 + \phi'_1)$$

$$(\nabla \phi)_{nb} = (\phi_1 - \phi_0)/L + dx(\phi'_1 + \phi'_0) \quad (3)$$

添字nbは境界面を、0, 1は近傍2点 x_0, x_1 を示す。

dx : 線分 x_0x_1 と境界面の交点と、面重心点の距離
 ϕ' S方向の偏微分

となる。

また、Voronoi法の特徴はFDMとの整合性にもある。構造型直交格子において保存形式のFDMとVoronoi法の離散化式が一致することが示されているが⁹⁾、非構造型格子についてもFDMを次の様に拡張することで評価できる。すなわち、各微係数が基準格子点と近傍点の離散値によって線形的に

$$\psi = a_0\phi_0 + \int_{nb} a_{nb}\phi_{nb} \quad (4)$$

ψ : 微係数 ($\phi_x, \phi_y, \phi_{xy}$)

a : 重み係数

ここで、添字0は基準格子点をnb (= 1, 2, ...)は近傍点をあらわす。

と表されると仮定して、基準格子点を原点に近傍点における2変数関数のテーラー級数展開を考える。式(4)の係数 a_0, a_{nb} は

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots \\ y_1 & y_2 & \dots \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots \\ x_1y_1 & x_2y_2 & \dots \\ y_1^2 & y_2^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \mathbf{b} \quad (5)$$

$$\mathbf{a}_0 = \sum_{nb}^{nb} \mathbf{a}_{nb} \quad (nb = 1, 2, \dots)$$

\mathbf{b} はたとえば

$$\phi_x \Rightarrow (1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots)^t$$

$$\phi_{xx} \Rightarrow (0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ \dots)^t$$

を満たすものとして与えられる。たとえば、典型的な三角形格子(図4)に対する $\phi_x, \nabla^2\phi$ の中心差分表式、

$$\begin{cases} \phi_x \cdot \text{Vol} = s_1(\phi_1 - \phi_4) + (h - s_1)(\phi_2 - \phi_3 - \phi_5 + \phi_6) \\ \nabla^2 \phi \cdot \text{Vol} = \frac{s_1}{l_1}(\phi_1 + \phi_4) + \frac{s_2}{l_2}(\phi_2 + \phi_5) + \frac{s_3}{l_3}(\phi_3 + \phi_6) \\ \text{Vol} = 2l_1h = s_1l_1 + s_2l_2 + s_3l_3 \\ l_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2}, \quad l_2 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2}, \quad l_3 = \sqrt{x_3^2 + y_3^2} \end{cases} \quad (6)$$

は式(4), (5)を満たす。この意味で、Voronoi法はFDMの自然な拡張となっているともいえる。

3. 安定化スキームの導入

一般に高レイノルズ数流れの解析では、中心差分相当の離散化スキームは数値的に不安定であることが知られている⁷⁾。その解決法として、対流フラックス(非圧縮流れ場では流速)をパラメータにした、いわゆる風上スキームが提案されている。ただし、1次精度の風上スキームの導入は例外なく過大な数値粘性を与えることが種々の問題で明らかにされており⁸⁾、汎用的な解析法では採用できない。よって、少なくとも2次の打ち切り誤差精度をもつ空間離散化スキームを非構造型格子上で構成することを考える。

まず、従来の方法を概観すると、FEMでは重み関数を修正するか⁹⁾、要素外の格子点を参照することにより風上化スキーム²⁾が導出されている。重み関数を修正する場合に2次精度を保つには2次以上の補間関数を適用する必要がある。しかし、この場合質量集中化による係数行列の対角化は適用できないため、大規模問題で効率のよい陰解法を得るには適さない。一方、要素外の点を参照する方法は、構造型格子におけるFVMでの手法の拡張として理解しやすいが、風上側の格子点を選択するアル

研究速報
 ギリズムが必要であるため多重格子や適合格子手法に適用する際に計算手順を複雑化する点に問題がある。

ところで、FVMにおいては拡散対流項の離散化に関する限り、セル境界面での補間精度だけが問題であり、境界面を挟む2点の情報(関数値および微係数)のみで補間式を与えれば、非構造型格子に適した離散化スキームが得られる。格子点での微係数の定義が得られれば、構造型格子と非構造型格子で共通の離散化法が適用できる利点に着目して、この手法(以下2点補間法とよぶ)による定式化を行う。

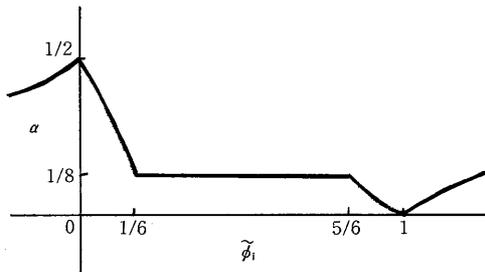
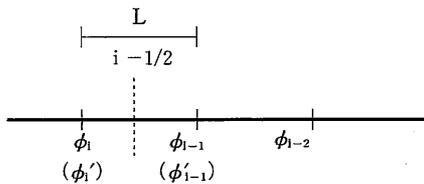


図5 SMARTスキームの係数 α

代表的な2次精度風上スキームであるQUICKスキームの構造型格子での離散化式は



$u \geq 0$ のとき

$$(u\phi)_{i-1/2} = u_{i-1/2} \left(\frac{3}{8}\phi_1 + \frac{6}{8}\phi_{i-1} - \frac{1}{8}\phi_{i-2} \right)$$

$u < 0$ のとき

$$(u\phi)_{i-1/2} = u_{i-1/2} \left(\frac{1}{8}\phi_{i+1} + \frac{6}{8}\phi_i + \frac{3}{8}\phi_{i-1} \right) \quad (7)$$

であるが、2点補間法では

$u \geq 0$ のとき

$$(u\phi)_{i-1/2} = u_{i-1/2} \left\{ \left(\frac{1}{4}\phi_i + \frac{3}{4}\phi_{i-1} \right) + \frac{1}{4}\phi_{i-1}L \right\}$$

$u < 0$ のとき

$$(u\phi)_{i-1/2} = u_{i-1/2} \left\{ \left(\frac{3}{4}\phi_i + \frac{1}{4}\phi_{i-1} \right) - \frac{1}{4}\phi_{i-1}L \right\} \quad (8)$$

と書き直される。そこで、1階微係数を2次中心差分で

$$\phi'_{i-1} = \frac{1}{2L}(\phi_i - \phi_{i-2}) \quad (9)$$

と定義すれば、式(7)と(8)は収束解が得られれば同値である。計算安定性に関するいくつかの基準に照らしてみると表1の結果となり、2点補間法QUICKでは標準QUICKにくらべ若干安定性の面で劣るが、中心差分に対しては十分改善されることがわかる。

ところで、2次以上の打ち切り誤差精度をもつ風上化スキームは高レイノルズ数流れの解析においてかならずしも安定ではなく、実際の問題でも収束解の得られないケースが報告されている⁹⁾。また、本来は陽解法における物理的考察、あるいは、1次元移流拡散方程式の解析解を根拠として提案された風上化スキームが、そのまま、多次元問題の解法に適合するとはいえない。そこで、計算安定化に関する最近の研究では、流速の符号のみによる風上化ではなく、補間式あるいは離散式の解に対する制約条件により安定化スキームを定式化する試みがなされている。これらのスキームの性質は汎用的な解析法を構成する上で望ましいものであることから、2点補間法を適用して非構造型格子へ拡張をはかる。

表1 対流項の離散化スキームの安定性

安定性の基準	QUICK	2点補間QUICK	2次中心補間
対角成分 $a_0 > 0$	○ (3/8)	○ (1/2)	× (0)
$\partial b / \partial \phi_1 \leq 0$	—	× (-1/8)	—
$a_0 - \partial b / \partial \phi_1 > 0$	○ (3/8)	○ (3/8)	× (0)
$a_{NB} \geq 0$ の限界ベクレ数P (NB = i + 1, i - 1)	3/8	1/4	0
$\phi_i \geq \phi_{i-1/2} \geq \phi_{i-1}$	△ (条件あり)	△ (条件あり)	○
風上性 (式11の α)	1/8	1/8	0
打ち切り誤差	○ (x^2)	○ (x^2)	○ (x^2)

$$\int_s u \phi \cdot dn = a_i \phi_i - \sum_{NB} a_{NB} \phi_{NB} + b \quad (NB = \dots, i + 1, i - 1, \dots)$$

研 究 速 報

非圧縮性流れの定常解析に適用できる安定化スキームとしては、EXQUISITE法¹⁰⁾やSMART法¹¹⁾などが提案されている。これらのスキームは、標準化した補間値

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_{i-1}}{\phi_i - \phi_{i-1}} \quad (10)$$

を評価パラメータとしていくつかの既知のスキームを切り換えることで与えられている。たとえば、SMART法においては、

$u \geq 0$ のとき

$$\phi_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1}) - \alpha(\phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2})$$

ただし、 α は以下の関係式を解いて定める。

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{\phi}_i < 0 \text{ または } \tilde{\phi}_i > 0 \cdots & \tilde{\phi}_{i-1/2} = \tilde{\phi}_i \\ \frac{1}{6} > \tilde{\phi}_i > 0 \cdots \cdots \cdots & \tilde{\phi}_{i-1/2} = 3\tilde{\phi}_i \\ \frac{5}{6} > \tilde{\phi}_i > \frac{1}{6} \cdots \cdots \cdots & \tilde{\phi}_{i-1/2} = \frac{3}{8} + \frac{3}{4}\tilde{\phi}_i \\ 1 > \tilde{\phi}_i > \frac{5}{6} & \tilde{\phi}_{i-1/2} = 1 \end{array} \right. \quad (11)$$

$u < 0$ のときは座標を反転して与える。

と定式化されている。ここで、係数 α は図5のように変化する。式(10)、(11)を2点補間法で書き直せば、

$$\tilde{\phi} = 1 - \frac{\phi - \phi_{i-1}}{2\phi_{i-1}L} \quad (12)$$

$u \geq 0$ のとき

$$\phi_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1}) - 2\alpha(\phi_i - \phi_{i-1}) + \phi_{i-1}L \quad (13)$$

α の定義は式(11)と同じ、 ϕ_{i-1} は線分 $x_i x_{i-1}$ 方向の微係数となる。なお、プログラミングの観点からは、上式を適当な関数式で表すと計算効率が向上する場合があります、たとえば、

$$\begin{aligned} (u\phi)_{i-1/2} &= \left(\frac{1}{2}u - 2\alpha|u|\right)\phi_i \\ &\quad + \left(\frac{1}{2}u + 2\alpha|u|\right)\phi_{i-1} + \alpha L \cdot u\phi'_{up} \\ \alpha &= \frac{\max\{\hat{H} - 1, \min(9\hat{H} + 3, 0, 1 - 3\hat{H})\} + \frac{1}{8}}{2\hat{H}} \end{aligned}$$

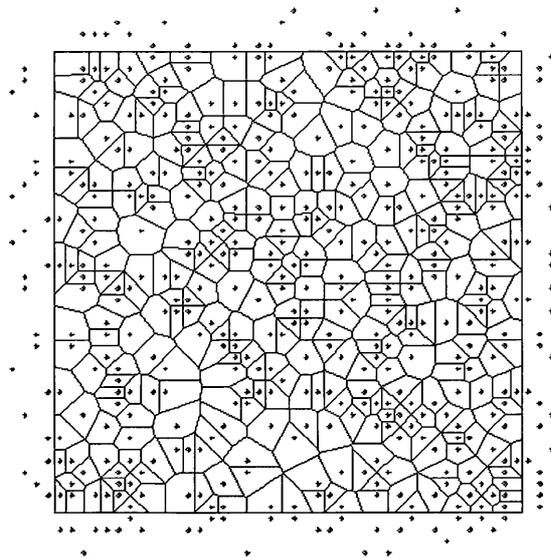
$$\hat{H} = \tilde{\phi}_i - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi'_{up}L} \right)$$

$$u\phi'_{up} = \frac{1}{2} \left\{ (|u| - u)\phi'_i + (|u| + u)\phi'_{i-1} \right\} \quad (14)$$

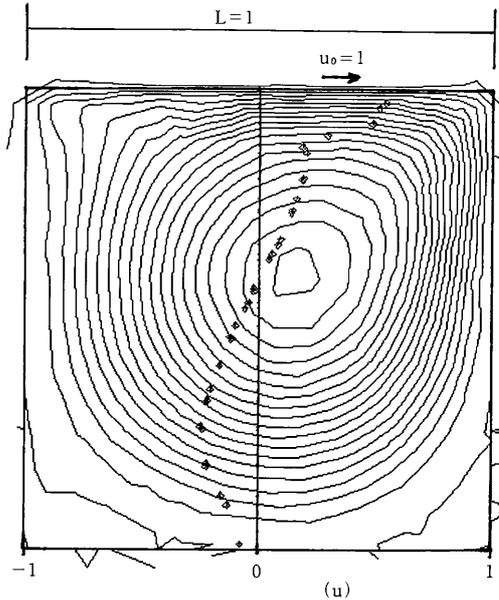
ただし、max, minは最大、最小値を与える関数
また、 $\phi'_{up} \rightarrow 0$, $2\hat{H} \rightarrow 0$ のときは、それぞれ1次風上スキーム、QUICKスキームになるように例外処理が必要。

とまとめられる。

最後に、2点補間SMARTスキームを非構造型格子に適用した計算例を図6に示す。



a) 格子点配置およびVoronoi diagram
(有効格子点数400)



b) 流線図および垂直中央断面速度分布
($\Delta t = 0.005$, $Re = 1000$)

図6 非構造型格子による正方キャビティ流れの解析例

研究速報

4. ま と め

非構造型格子による流れ場解析手法として、Voronoi diagramを利用したFVMと、2点補間法による安定化スキームを提案した。これらは、2次元非圧縮性流れの定常解析例において良好な結果を与えている。

参 考 文 献

- 1) 松田, 加藤, 飯田, 第4回数値流体力学シンポジウム論文集(1990), 311-314
- 2) 藤間, 田端, 第4回数値流体力学シンポジウム論文集(1990), 323-326
- 3) 谷口, 荒川, 小林, 機械学会論文集B55-513 (1989),

1324-1328

- 4) 池田, 電力中央研究所報告680001 (1980)
- 5) 岡永, 棚橋, 機械学会論文集B56-528(1990), 2372-2377
- 6) S.V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere (1980)
- 7) P.J. Roche (高橋他訳), コンピュータによる流体力学
- 8) 荒川, 小林, 第1回CFD-WS報告, 機械学会(1989)
- 9) 前川, 日本原子力学会誌28-9 (1987), 823-833
- 10) B.P. Leonard, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 19 (1979) 59
- 11) P.H. Gaskell and A.K.C. Lau, Int. J. Num. Meth. Fluids 8 (1988), 617-641

研究速報